2021年6月18日　統計数理研究所　オープンハウス

分散不均一なガウス確率場に対するチューブ法

栗木　哲　数理・推論研究系　教授

本発表は，竹村彰通 (客員教授，滋賀大教授)，Jonathan E. Taylor (Professor of Stanford Univ.) 両氏との共同研究 [1] に基づきます．

1　半径が不均一なチューブ

Mを$\mathbb{R}^n$の単位球面$\mathbb{S}^{n-1}$のd次元C^2閉部分多様体とし，$\xi\sim\mathcal{N}_n(0,I_n)$をもちいて$M$を添字集合とする2つの確率場を定義する．

$$X(u)=\sigma(u)\langle u,\xi\rangle,\quad Y(u)=\sigma(u)\langle u,\xi/\|\xi\|\rangle,\quad u\in M.$$

$X(\cdot)$は平均0，分散$\mathrm{Var}(X(u))=\sigma(u)^2$，相関構造$\mathrm{Corr}(X(u),X(v))=\langle u,v\rangle$のガウス確率場である．目的は確率場$X(\cdot)$の最大値分布

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}X(u)>c\Big)\quad(c\text{が大きいとき})$$

の近似を与えることである．

まずξと$\xi/\|\xi\|$が独立に分布することから

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}X(u)>c\Big)=\mathbb{E}\Big[\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}Y(u)>\frac{c}{\|\xi\|}\mid\|\xi\|\Big)\Big].$$

さらに$\xi/\|\xi\|\sim\mathrm{Unif}\big(\mathbb{S}^{n-1}\big)$であるから

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}Y(u)>b\Big)=\mathbb{P}\Big(\exists u\in M,\,Y(u)>b\Big)=\frac{1}{\Omega_n}\mathrm{Vol}_n\big((M)_{b/\sigma}\big),$$

ここで$\Omega_n=\mathrm{Vol}_{n-1}\big(\mathbb{S}^{n-1}\big)=2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$，また

$$(M)_f=\big\{w\in M\mid\exists u\in M,\,\langle u,w\rangle>f(u)\big\}$$

はMのまわりのチューブ状領域．$\max_{u\in M}X(u)$の分布はこのチューブの体積を通して導出することができる（チューブ法）．

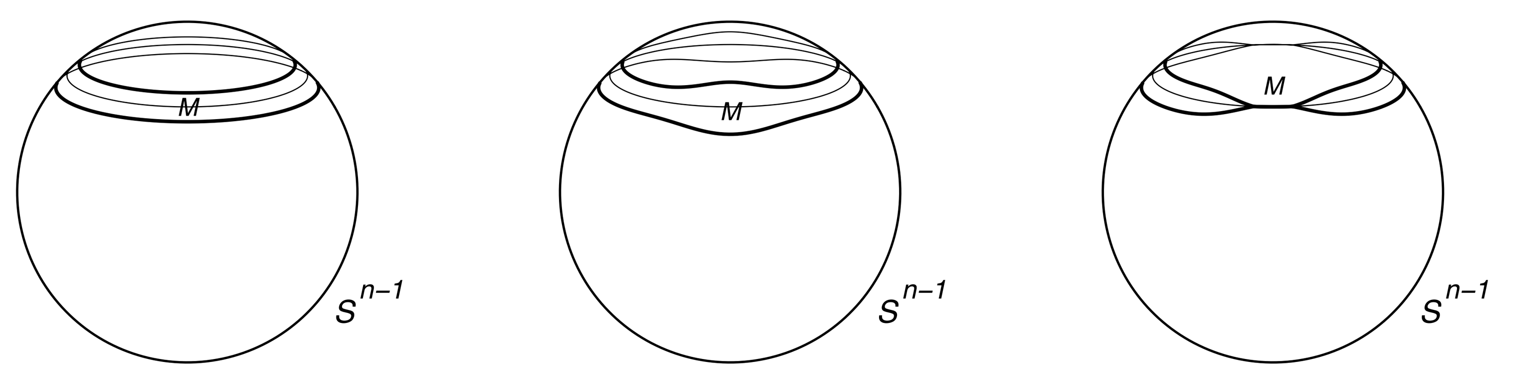


図1. チューブ$(M)_{b/\sigma}$ (左：均一分散，中央，右：不均一分散)

2　チューブの体積公式と最大値の分布

Mを$\mathbb{R}^n$から誘導される計量g_{ij}を持ったリーマン多様体と考える．共変微分を∇で表す．$\ell(u)=\log\sigma(u)$, $c_{ij}=-\nabla_i\nabla_j\ell+\nabla_i\ell\nabla_j\ell$, $G=(g_{ij})$, $C=(c_{ij})$, $\widetilde{G}=(\tilde{g}_{ij})=G+C$, $G^{-1}=(g^{ij})$, $\widetilde{G}^{-1}=(\tilde{g}^{ij})$などとおく．曲率テンソルを$R_{ij,kl}$とする．有限集合$I$ ($n=|I|$は偶数) に対して$\Pi(I)=\{(\pi_1,\dots,\pi_n)\mid\{\pi_1,\dots,\pi_n\}=I,\ \pi_1<\pi_2,\dots,\pi_{n-1}<\pi_n\}$, $\Pi_n=\Pi(\{1,\dots,n\})$とおく．

定理 2.1 (チューブの体積). $\mathrm{d}u$をMの$u\in M$における体積要素とする．定数$b_c<\max_{u\in M}\sigma(u)$が存在し，$b\ge b_c$について

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}Y(u)>b\Big)=\sum_{e=0}^{d}\frac{1}{(2\pi)^{e/2}\Omega_{d-e+1}}\int_M\frac{\det(I+CG^{-1})}{(1+\|\nabla\ell\|^2)^{\frac12(d-e+1)}}\times\bar{B}_{\frac12(d-e+1),\frac12(n-d+e-1)}\Big(\frac{1+\|\nabla\ell\|^2}{\sigma^2}b^2\Big)\zeta_e(u)\,\mathrm{d}u.$$

$\bar{B}_{a,b}(\cdot)$はベータ分布の上側確率，eが奇数のとき$\zeta_e(u)=0$，偶数のときは

$$\zeta_e(u)=\sum_{I\subset\{1,\dots,d\},\,|I|=e}\frac{1}{(e/2)!}\sum_{\pi,\tau\in\Pi(I)}\mathrm{sgn}\binom{\pi}{\tau}\widetilde{R}_{\pi_1\pi_2}^{\tau_1\tau_2}\cdots\widetilde{R}_{\pi_{e-1}\pi_e}^{\tau_{e-1}\tau_e},$$

$$\widetilde{R}_{ij}^{kl}=\sum_{m,n=1}^{d}\Big(R_{ij,mn}-\big(g_{im}g_{jn}-g_{in}g_{jm}\big)\Big)\tilde{g}^{mk}\tilde{g}^{nl}.$$

定理 2.2 (チューブ法). $c\to\infty$のとき,

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}X(u)>c\Big)=\sum_{e=0}^{d}\frac{1}{(2\pi)^{e/2}\Omega_{d-e+1}}\int_M\frac{\det(I+CG^{-1})}{(1+\|\nabla\ell\|^2)^{\frac12(d-e+1)}}\times\bar{G}_{d-e+1}\Big(\frac{1+\|\nabla\ell\|^2}{\sigma^2}c^2\Big)\zeta_e(u)\,\mathrm{d}u+O(\bar{G}_n(c^2/b_c^2)).$$

ただし$\bar{G}_\nu(\cdot)$は自由度νのカイ2乗分布の上側確率.

$\sigma(u)$がその最大値$\sigma_0=\max_{u\in M}\sigma(u)$を達成する点$u$の集合$M_0$が$d_0$次元の$C^2$多様体をなすとする．チューブ法公式の主要項 ($e=0$の項) をラプラス近似して以下を得る.

定理 2.3 (ラプラス近似). $\mathrm{d}u_0$をM_0の体積要素とする．$c\to\infty$のとき,

$$\mathbb{P}\Big(\max_{u\in M}X(u)>c\Big)\sim\frac{1}{\Omega_{d_0+1}}\int_{M_0}\frac{\det(I+CG^{-1})^{\frac12}}{\mathrm{tr}_{d-d_0}(CG^{-1})^{\frac12}}\mathrm{d}u_0\,\bar{G}_{d_0+1}(c^2/\sigma_0^2).$$

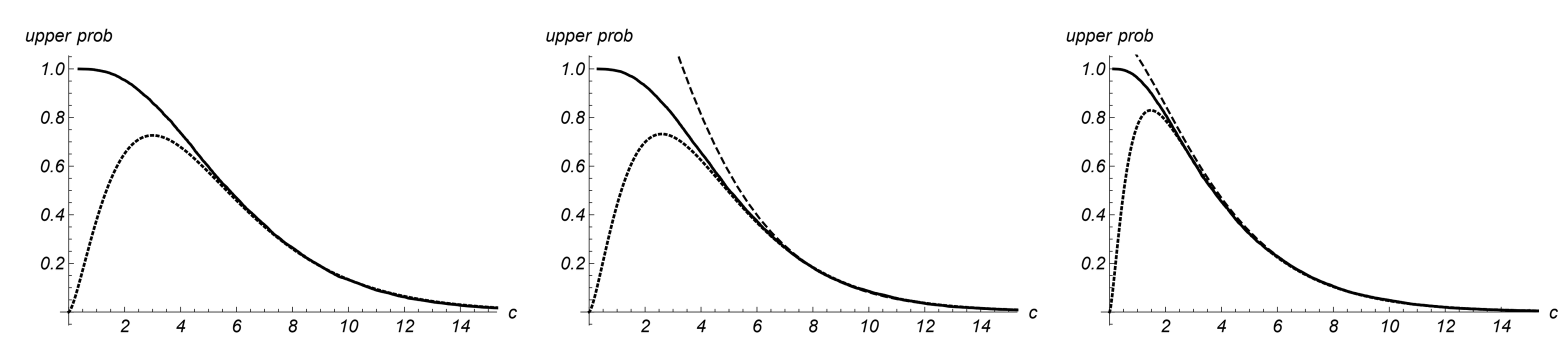
ただし$\mathrm{tr}_{d_0}(\cdot)$は固有値のd_0次基本対称式.

3　例題：ウィシャート行列の最大固有値

ウィシャート行列$\mathcal{W}_p(\nu,\Lambda)$の最大固有値は，ガウス行列の最大特異値

$$s_1=\max_{\|v\|=\|w\|=1}v^\top\Lambda^{\frac12}\Xi w,\quad\Xi=(\xi_{ij})_{p\times\nu},\quad\xi_{ij}\sim\mathcal{N}(0,1)\ \text{i.i.d.}$$

の2乗である．s_1はガウス確率場の最大値であるのでチューブ法が適用できる．



$\Lambda=\mathrm{diag}(1,1)$　$\Lambda=\mathrm{diag}(1,3/4)$　$\Lambda=\mathrm{diag}(1,1/4)$

図2. ウィシャート行列$\mathcal{W}_2(4,\Lambda)$の最大固有値の上側確率
(—: シミュレーション (10000回), ····: チューブ法, – –: ラプラス法)

A　行列式に対するWick公式

以下の補題は第2基本形式と曲率テンソルの関係 (ガウス方程式) の一般形であり，定理2.1の証明に用いられる.

補題 A.1. $H=(h_{ij})$を$d\times d$の平均0の正方ガウス行列とする．$s_{ij;kl}=\mathbb{E}[h_{ik}h_{jl}-h_{il}h_{jk}]$とおく．$d$が偶数のとき,

$$\mathbb{E}[\det(H)]=\frac{1}{(d/2)!}\sum_{\pi,\tau\in\Pi_d}\mathrm{sgn}(\pi)\,\mathrm{sgn}(\tau)s_{\pi_1\pi_2;\tau_1\tau_2}s_{\pi_3\pi_4;\tau_3\tau_4}\cdots s_{\pi_{d-1}\pi_d;\tau_{d-1}\tau_d}.$$

参考文献

[1] Satoshi Kuriki, Akimichi Takemura, and Jonathan E. Taylor, The volume-of-tube method for Gaussian random fields with inhomogeneous variance, in preparation.